

文章编号: 2095-0411 (2011) 03-0033-04

间歇精馏分子异丙醇—水二元共沸物的模拟^{*}

黄路, 叶青, 孙文雅

(常州大学 石油化工学院, 江苏 常州 213164)

摘要: 以乙二醇为溶剂, 使用 Aspen Plus 化工模拟软件中的 BatchFrac 模块, 基于 UNIFAC 模型, 对异丙醇—水二元共沸物的间歇萃取精馏过程进行间歇萃取精馏模拟, 研究了不同操作参数(如溶剂比、回流比、溶剂进料位置、溶剂进料温度等)对整个精馏过程的影响, 对各工艺参数进行了分析与优化。结果表明, 对于处理量为 100 kmol 的异丙醇—水溶液, 精馏塔具有 20 块塔板, 溶剂比为 2, 回流比为 5, 溶剂进料位置在第 3 块塔板, 溶剂进料温度为 80℃ 时, 塔顶异丙醇质量分数可达 0.998, 收率可达 0.978。

关键词: 间歇萃取精馏; 异丙醇; 乙二醇; 模拟; 优化

中图分类号: TQ202

文献标识码: A

Simulation of Separating Isopropanol—Water Azeotropic Mixture Batch Extractive Distillation

HUANG Lu, YE Qing, SUN Wen—ya

(School of Petrochemical Engineering, Changzhou University, Changzhou 213164, China)

Abstract: Batch extractive distillation for isopropanol—water mixture was simulated and optimized. Simulation of batch extractive distillation was executed by BatchFrac module of Aspen Plus simulation software, based on UNIFAC model, glycol as the extractant. The effect on the process of different operation parameters was also studied, such as solvent ratio, mole reflux ratio, solvent feeding location, solvent feeding temperature. Sensitivity analysis was also performed to optimize the operation parameters. The simulation results showed that it was possible to separate isopropanol—water azeotropic mixture by batch extractive distillation using glycol as extractant. When isopropanol—water azeotropic mixture was 100 kmol and stage numbers of extractive distillation column was 20, solvent feeding location was 3, solvent feeding temperature was 80℃, mole reflux ratio was 5 and solvent ratio was 2, the mass fraction of isopropanol at the column top could reach 0.998. The results of simulation and optimization supply certain guidance for the deep application of batch extractive distillation in industry.

key words: batch extractive distillation; isopropanol; glycol; simulation; optimization

异丙醇 (IPA) 是一种广泛应用的有机化工原料。目前, 随着全球环境保护意识的增强, 利用异

^{*} 收稿日期: 2010-12-31

作者简介: 黄路 (1987—), 男, 安徽定远人, 硕士生。通讯联系人: 叶青。

丙醇代替含氯溶剂和氟氯烃做集成电路的清洗剂已越来越受到人们的重视, 其对异丙醇的纯度要求较高。由于常压下异丙醇与水在 80.3℃ 形成共沸物, 其中异丙醇含量为 87.4% (质量分数), 工业生产过程需要从大量的异丙醇稀水溶液中分离精制以得到高纯度异丙醇, 而采用普通蒸馏方法无法得到纯度高于共沸组成的异丙醇^[1-6]。

分离异丙醇—水体系的传统工艺是用苯共沸精馏法, 由于苯对人体的危害, 该工艺方法将逐渐被取代。目前出现的新的分离工艺主要有: 吸附蒸馏, 萃取精馏, 渗透汽化法, 加盐萃取共沸精馏^[3]。

间歇萃取精馏^[7,8] 作为一个新兴的研究课题, 它同时具备间歇精馏的灵活性、经济性和萃取精馏的实用性^[9-12]。它是通过向精馏塔上部加入适当流量的溶剂以增大共沸物组分之间的相对挥发度, 从而使难分离物系转化为易分离物系, 让分离得以实现并降低成本的一种特殊间歇精馏技术。因此在共沸物的分离方面具有明显的优越性^[13-16]; 如通过选取不同的溶剂, 可完成普通精馏无法完成的分离过程; 设备简单、投资较小; 可单塔分离多组分混合物; 设备通用性强, 可用同一塔处理种类和组成不同的物系; 对于近沸物和共沸物的分离, 与共沸精馏相比操作过程简单, 有较好的经济性。

本文以乙二醇为溶剂, 使用 Aspen Plus 化工模拟软件中的 BatchFrac 模块, 基于 UNIFAC 模型, 对异丙醇—水体系的间歇萃取精馏过程进行模拟, 优化了工艺参数, 模拟和优化的结果为间歇萃取精馏在工业上的进一步应用提供了一定的指导作用。

1 间歇萃取精馏流程工艺

1.1 流程工艺分析

在模拟中, 从塔底一次性加入异丙醇—水原料, 经过塔釜再沸器加热, 形成上升蒸汽, 同时, 在间歇精馏塔的上部加入溶剂乙二醇, 乙二醇为连续进料。溶剂与原料充分作用, 改变了异丙醇和水的相对挥发度, 使分离更易进行。

出料共分为 4 个阶段, 即异丙醇出料阶段、过渡段、水的收集阶段以及溶剂回收阶段。每次规定值下的出料都在收集器中进行收集, 然后一次性清空, 再进行下一阶段产品的收集。

1.2 模拟基础数据

模拟基础数据见表 1。

2 模拟结果与讨论

原料进料组成为质量分数 87.4% 的异丙醇, 12.6% 的水, 原料中水的含量相对较少, 故此仅讨论操作条件改变对产品异丙醇的影响。

表 1 模拟基础数据

Table 1 The initial data of simulation

项目	设定值
原料进料组成	m (异丙醇): m (水) = 0.874: 0.126
原料进料状况	常压、泡点、100 kmol/h, 进料 1 h
乙二醇进料状况	常压、80℃、120 kmol/h
塔板数	20 块
塔顶压力	常压

2.1 溶剂比的影响

在原料进料量为 100kmol, 溶剂进料速率为 120kmol/h, 进料温度为 80℃, 塔板数为 20, 溶剂进料板位置为 3, 回流比为 5 的条件下进行。改变间歇萃取精馏的溶剂比, 考察溶剂比对塔顶异丙醇产品质量分数及收率的影响。模拟结果如图 1 所示。

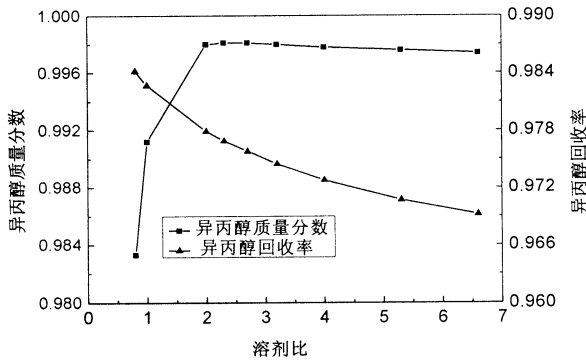


图 1 溶剂比对产品分离效果的影响

Fig. 1 Influence of solvent ratio

由图 1 可知, 溶剂的加入改变了原料物系的相对挥发度, 理论上讲, 溶剂用量越大, 分离效果越明显。但溶剂比过大, 会增加塔底再沸器的热负荷, 还会使溶剂在再沸器中的累积量加大, 导致再沸器的容量也要相应的加大, 也为后续溶剂回收带来困难。溶剂的大量加入稀释了塔中的产品异丙醇, 导致产品采出量有所降低, 不利于回收, 故产品收率略微有所降低。这些都造成了经济上的不合理, 在分离要求等达到的前提下, 存在适宜的溶剂用量。因此, 综合考虑, 溶剂比为 2 时, 异丙醇的质量分数达 0.998, 收率达 0.978, 较合适。

2.2 回流比的影响

在原料进料量为 100kmol，溶剂进料温度为 80℃，塔板数为 20，溶剂进料板位置为 3，溶剂比为 2 的条件下进行。改变间歇萃取精馏的回流比，考察回流比对塔顶异丙醇产品质量分数及收率的影响。模拟结果如图 2 所示。

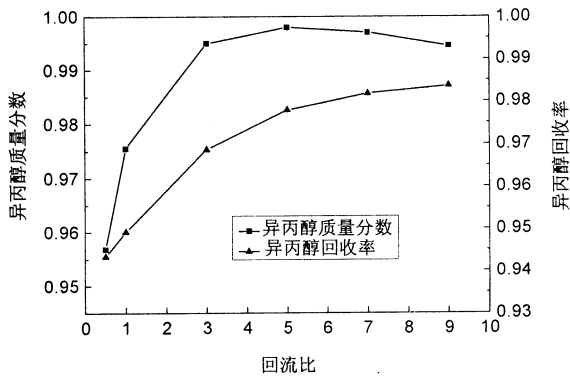


图 2 回流比对产品分离效果的影响

Fig. 2 Influence of reflux ratio

由图 2 可知，增大回流比可以提高产品的分离效果。但增大回流比至一定程度时，部分轻组分会随着溶剂回落到塔内，回流量过多会降低塔板上萃取剂的浓度，使组分间的相对挥发度减小，不利于产品质量分数的提高。同时回流比过大，意味着操作能耗的增加，在经济上不合理。因此，综合考虑，在满足分离要求的条件下，取回流比为 5 比较合适，此时异丙醇产品质量分数达 0.998，收率达 0.978。

2.3 溶剂进料位置的影响

在原料进料量为 100kmol，溶剂进料温度为 80℃，塔板数为 20，溶剂比为 2，回流比 5 的条件下进行。改变间歇萃取精馏中乙二醇进料位置，考察溶剂进料位置对产品质量分数的影响。模拟结果如图 3 所示。

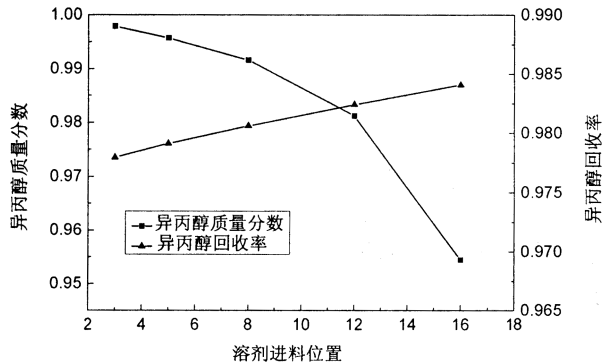


图 3 乙二醇进料位置对产品分离效果的影响

Fig. 3 Influence of solvent feeding location on the separation of mixture

由图 3 可知，当溶剂直接从接近塔釜处加入时，不能很好的分离物系。进料位置越高，越能使塔内各板的液相中均保持一定比例的溶剂，改变组分间相对挥发度效果越好，分离越彻底。综合考虑，溶剂进料位置为第 3 块塔板时比较好，此时异丙醇的质量分数达 0.998，收率达 0.978。

2.4 溶剂进料温度的影响

在原料进料量为 100kmol，塔板数为 20，溶剂进料板为 3，溶剂比为 2，回流比 5 的条件下进行。改变间歇萃取精馏的乙二醇进料温度，考察乙二醇进料温度对产品质量分数的影响。模拟结果如图 4 所示。

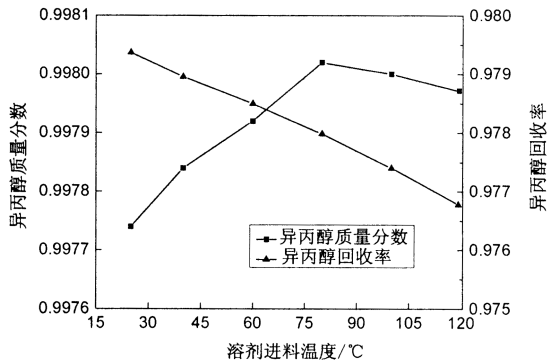


图 4 乙二醇进料温度对产品分离效果的影响

Fig. 4 Influence of solvent feeding temperature on the separation of mixture

由图 4 可知，溶剂入塔温度应与塔内该处的温度相近或稍低，以减少塔釜供热量。而溶剂进料处塔板温度为 80.1℃，故溶剂进料温度取为 80℃。

2.5 精馏时间与塔内组成

间歇萃取精馏分离异丙醇—水体系在最佳条件下进行模拟后，精馏塔内各组分组成随时间的变化情况如图 5 所示。

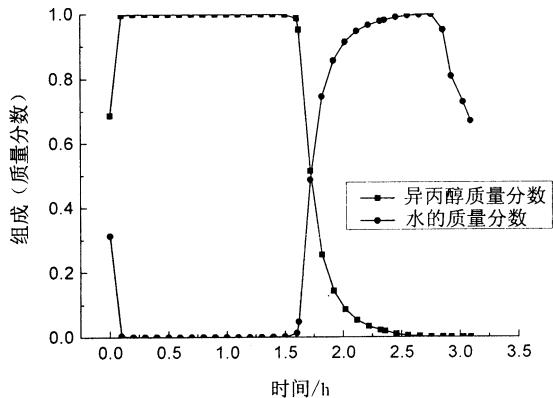


图 5 精馏时间与塔内组成关系图

Fig. 5 Diagram of composition on different time

从图 5 中可以看出在整个精馏过程中, 塔内轻组分异丙醇和重组分水组成的变化情况。在精馏进行的前 1.6h 内, 异丙醇和水的组成基本保持不变, 该时间段为异丙醇的收集阶段。随后, 塔内组成发生明显变化, 异丙醇含量急剧下降, 至 2.3h 后, 开始缓慢下降, 最终接近 0, 此时, 停止加入乙二醇。塔内水的组成从 1.6h 开始急剧上升, 2.3—2.7h 内, 组成基本保持不变, 该阶段为水的收集阶段, 该阶段中, 主要是将塔釜剩余的水与溶剂乙二醇分离开来, 并收集产品水。

3 结 论

模拟所得最佳工艺参数如下: 原料进料量为 100kmol, 塔板数为 20, 溶剂比为 2, 回流比为 5, 溶剂进料板位置为 3, 溶剂进料温度 80℃ 时, 塔顶产品异丙醇最终出料时质量分数为 99.8%, 总出料量为 3 976.7kg/h, 收率可达 97.8%。

可见, 模拟结果较好的达到了预期的实验效果, 所做模拟很好的反映了整个间歇萃取精馏的过程, 所得实验参数优化了实验操作, 对实际条件下的间歇萃取精馏应用提供了一定的指导作用。

参考文献:

- [1] 陈洪钊, 刘家祺. 化工分离过程 [M]. 北京: 化学工业出版社, 2003.
- [2] 朱登磊, 任根宽, 谭超. 萃取精馏分离异丙醇—水共沸体系的模拟与优化 [J]. 化学工程师, 2009 (10): 13—16.
- [3] 王惠媛, 许松林. 异丙醇—水分离技术进展 [J]. 上海化工,

2005, 30 (6): 20—23.

- [4] 张志刚, 徐世民, 李鑫钢, 等. 常规间歇萃取精馏分离苯—环己烷的研究 [J]. 化学工程, 2006, 34 (4): 5—8.
- [5] 李春风, 张雪梅, 张志刚, 等. 间歇萃取精馏分离苯—环己烷 [J]. 化学工业与工程, 2005, 22 (6): 422—426.
- [6] 崔现宝, 周金波, 张宾山, 等. 间歇萃取精馏分离乙腈—甲苯共沸体系 [J]. 化学工业与工程, 2006, 23 (6): 527—531.
- [7] Lei Z G, Li C Y, Li Y X, et al. Separation of acetic acid and water by complex extractive distillation [J]. Pur Tech, 2004, 36: 131—138.
- [8] 华超, 李鑫钢, 徐世民, 等. N—甲酰吗啉—乙二醇混合溶剂间歇萃取精馏苯—甲基环戊烷的研究 [J]. 天然气化工, 2006, 31: 22—27.
- [9] Robinson C S, Gilliland E R. Elements of fractional distillation [M]. New York: McGraw—Hill, 1950.
- [10] Attarwala F T, Abrams H J. Optimization techniques in binary batch distillation [M]. London: Imperial College Press, 1974.
- [11] Robinson C S. Batch distillation design [M]. New York: McGraw—Hill, 1950.
- [12] Bortolini P, Guarise G B. A new practice of batch distillation [J]. Quad Ing Chim Ital, 1970, 6 (9): 150—159.
- [13] Hasebe S, Kurooka T, Hashimoto I. Comparison of the separation performances of a multi—effect batch distillation system and a continuous distillation system [M]. Denmark: ProcIF—AC—Dycord, 1995.
- [14] Athanasios I P, Patrick L. Efficient integration of optimal solvent and process design using molecular clustering [J]. Chem Eng Sci, 2006, 61: 6 316—6 336.
- [15] Xu S L, Wang H Y. A new entrainer for separation of tetrahydrofuran—water azeotropic mixture by extractive distillation [J]. Chem Eng Pro, 2006, 45: 954—958.
- [16] Wu H, Xu S M, Hu H, et al. Shortcut algorithm for simulation of batch extractive distillation [J]. Transactions of Tianjin University, 2007, 13 (6): 428—432.